

POLINOMIOS ORTOGONALES EN LAS APROXIMACIONES DISCRETAS POR MÍNIMOS CUADRADOS - PROGRAMA OrthPolyFit

Adriana O. Mastrogiovanni

Carrera de Licenciatura en Física, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y
Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario,
Argentina

RESUMEN

1. Fundamentos matemáticos-Se considera el problema de aproximar una función cuyos valores, en una secuencia de puntos, son conocidos en forma empírica y por consiguiente están sujetos a errores inherentes. El objetivo es aproximar la función $f(x)$ por una combinación lineal de $\{\varphi_j(x)\}$ $j = 0, \dots, M$. Utilizando el principio de los mínimos cuadrados se resuelve el sistema de ecuaciones normales. Con aproximaciones polinomiales y en los casos en que $\varphi_j(x) = x^j$ o $\varphi_j(x) = P_j(x)$ siendo $P_j(x)$ cualquier polinomio de grado j existen problemas analíticos y computacionales. Se resuelven haciendo uso de polinomios ortogonales. **2. Desarrollo de software**-El programa OrthPolyFit realiza una regresión en función de polinomios ortogonales. **3. Ejemplos**-Se presentan ejemplos de distintos casos. Se observa la secuencia de desviaciones típicas.

ABSTRACT

1. Mathematical bases-Is considered the problem of approximating a function whose values, in a points sequence, they are known in empirical form and consequently they are subject to inherent mistakes. The objective is to approximate the function $f(x)$ by a linear combination of $\{\varphi_j(x)\}$ $j = 0, \dots, M$. Using the principle of the minimal square is solved the normal equations system. With polynomials approximations and in the cases in which $\varphi_j(x) = x^j$ or $\varphi_j(x) = P_j(x)$ being $P_j(x)$ any polynomial of degree j exist analytical and computational problems. They are solved making use of orthogonal polynomials. **2. Software development**-The program OrthPolyFit accomplishes regression in orthogonal polynomials function. **3. Examples**- Are presented examples of different cases. It is observed the typical desviations sequence.

1. FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS

1.1. Introducción

Consideramos el problema de aproximar una función cuyos valores, en una secuencia de puntos, son conocidos en forma empírica y por consiguiente están sujetos a errores inherentes.

1.2. Principio de los mínimos cuadrados

$\{x_i\}$ $i = 1, \dots, n$	puntos dato
(a,b)	intervalo al cual pertenecen los puntos dato
$f(x_i)$	valores observados
$\tilde{f}(x)$	función
$f(x_i)$	valores exactos
$\{\varphi_j(x)\}$ $j = 0, 1, \dots$	secuencia de funciones

El objetivo es aproximar $f(x)$ por una combinación lineal de $\{\phi_j(x)\}$ $j = 0, \dots, M$ con las $a_j(M)$ a ser determinadas de tal manera que la suma de los cuadrados del error sobre $\{x_i\}$ sea reducida al mínimo.

$$f(x, M) \sim \sum_j a_j(M) \phi_j(x)$$

Para calcular las $a_j(M)$ resolvemos el sistema de **ecuaciones normales**.

Elegimos las $\{\phi_j(x)\}$ $j = 0, \dots, M$ como un **conjunto finito de funciones linealmente independientes** o sea una base finita.

Deben ser linealmente independientes para que la solución sea unívoca.

Que tengan producto escalar

$$\sum_{i=1}^n \phi_j(x_i) \phi_k(x_i) w(x_i)$$

y estén normalizadas o sea que la función peso

(1)

$$w(x_i) \equiv 1$$

(2)

1.3. Aproximaciones polinomiales

Caso en que

$$\phi_j(x) = x^j$$

1.3.1. Problema analítico

Desarrollamos los cálculos para resolver las ecuaciones normales.

Para valores pequeños de M , hasta 5 o 6, la experiencia indica que la solución proporciona buenas aproximaciones; pero para valores mayores de M , las soluciones conducen generalmente a aproximaciones progresivamente más deficientes.

Además, ésto es completamente independiente del método usado, elegido entre los muchos métodos útiles para la solución de ecuaciones normales.

Incluida la eliminación Gaussiana.

Puede darse una explicación de lo anterior diciendo que la matriz de los coeficientes es aproximadamente un múltiplo del menor principal de la matriz infinita de **Hilbert**.

Es una **matriz mal condicionada** o sea que cuando ha sido normalizada de tal manera que su elemento más grande tiene orden de magnitud 1, su inversa tiene elementos muy grandes.

El resultado de ésto es que en el cálculo de la solución de las ecuaciones normales, cualquier error cometido dará como resultado un error amplificado en la solución.

Por lo tanto debe manejarse en la computación un número prohibitivamente grande de cifras decimales.

El argumento anterior es convincente contra el uso de $\phi_j(x) = x^j$ para todos los valores de M pero principalmente para los no muy pequeños.

1.3.2. Problema computacional

Consideramos ahora esta clase de funciones desde otro punto de vista.

Dado el valor de n , elegir M (el grado del polinomio de aproximación).

Nuestra hipótesis es que la función exacta $f(x)$ es un polinomio de grado $M < n - 1$ o al menos puede ser exactamente representada por un polinomio de tal tipo.

Si elegimos un valor de $m < M$, es imposible obtener una buena representación.

Por otro lado, el elegir un valor $m > M$ también destruye nuestro propósito y sacrifica algo de las propiedades de **suavidad** de las aproximaciones por mínimos cuadrados.

Eligiendo $m \gg M$ perderemos todas las propiedades de suavidad.

Siendo

$\delta^2(M)$ suma de los cuadrados de los errores

$\sigma^2(M) = \delta^2(M) / (n - M - 1)$ desviación típica

En la práctica, como no conocemos M , trataremos de resolver las ecuaciones normales para $M = 1, 2, \dots$, calcular $\sigma^2(M)$ y continuar hasta donde $\sigma^2(M)$ decrezca significativamente con el incremento de M .

Una vez que se ha alcanzado un valor de M después del cual no ocurre decremento significativo, tendremos la aproximación por mínimos cuadrados deseada.

Computacionalmente, esto significa que debemos calcular la solución de las ecuaciones normales para una secuencia de valores de M , en virtud de que las soluciones para $M \leq r$ no pueden usarse en el cálculo de la solución para $M = r + 1$.

De esta manera, aun si los problemas analíticos no existieran, la necesidad de resolver las ecuaciones normales un número de veces sería por sí sola un fuerte argumento en contra del uso de $\phi_j(x)$.

1.4. Aproximaciones por polinomios ortogonales

Resolveremos tanto el problema computacional como el analítico haciendo uso de polinomios ortogonales.

Si

$\phi_j(x) = P_j(x)$

es un polinomio de grado j , para una elección arbitraria de las $\{P_j(x)\}$, los problemas de cómputo involucrados al resolver estas ecuaciones normales pueden ser tan serios como antes.

Sin embargo, si se eligen las $\{P_j(x)\}$ de tal manera que los términos no diagonales de la matriz de los coeficientes sean pequeños comparados con los elementos diagonales, entonces la matriz no será mal condicionada.

En particular, si los $P_j(x)$ son **ortogonales sobre el conjunto de puntos** $\{x_i\}$,

$$\sum_{i=1}^n P_j(x_i) P_k(x_i) = 0 \quad j \neq k$$

(3)

entonces los términos fuera de la diagonal serán todos cero.

La importancia está en el hecho de que la matriz se convierte en matriz diagonal.

El sistema tiene solución inmediata.

Además, a_j es en realidad independiente de M .

Por tanto, para calcular la solución para $M + 1$, necesitamos únicamente calcular un cociente más.

El desarrollo anterior indica que el uso de polinomios ortogonales nos evita dificultades analíticas y computacionales.

1.4.1. Generación de polinomios ortogonales sobre conjuntos discretos de puntos

1.4.1.1. Caso en el que los puntos dados están uniformemente espaciados

En aproximaciones por mínimos cuadrados con datos uniformemente espaciados, es conveniente usar cuando sea posible, un número impar de puntos y considerar como cero el punto medio del rango de las abscisas.

Si es necesario hacer una **transformación lineal** para que sean centradas.

Se obtienen los polinomios de Gram (o polinomios de Chebyshev).

Estos polinomios satisfacen una relación de recurrencia.

1.4.1.2. Caso en el que los puntos dados no están uniformemente espaciados

También pueden generarse, pero es trabajoso.

1.5. Número de puntos

Para una aproximación por mínimos cuadrados de un cierto grado dado, obtenemos un mayor ajuste mientras mayor sea el número de puntos $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, n$.

Recordemos que en 1.3.2. el valor esperado de

$\sigma^2(M) = \delta^2(M) / (n - M - 1)$ desviación típica

Es el resultado de hacer la hipótesis de que cada $f(x_i)$ es una observación de una población normal con media $f(x_i)$ y varianza constante σ_i^2 .

1.6. Oscilaciones en la desviación típica

En el caso

$$\sigma_j(x) = x^j$$

puede haber oscilaciones en la secuencia de desviaciones típicas.

Si los

$$\{P_j(x)\}$$

son ortogonales es posible que en la secuencia de desviaciones típicas haya pequeñas oscilaciones.

Las cuales posiblemente sean causadas por ajustar los picos o errores en los datos observados.

2. DESARROLLO DE SOFTWARE

**OrthPolyFit**

programa de regresión en función de polinomios ortogonales

Las ecuaciones normales se reducen a

$$\begin{aligned}
 a_1 \sum_{i=1}^n P_1(x_i) P_1(x_i) & \dots \dots & = \sum_{i=1}^n f(x_i) P_1(x_i) \\
 \vdots & & \\
 \dots & \dots & a_M \sum_{i=1}^n P_M(x_i) P_M(x_i) = \sum_{i=1}^n f(x_i) P_M(x_i)
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

Las a_j , $j = 0, \dots, M$ son independientes de M .

Relaciones de recurrencia de los polinomios de Gram

$$\begin{aligned}
 P_0(x) &= 1 \\
 P_1(x) &= x \\
 P_{i+1}(x) &= P_1(x)P_i(x) - \frac{i^2(N^2 - i^2)}{4(4i^2 - 1)} P_{i-1}(x)
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

En particular

$$\begin{aligned}
 P_2(x) &= x^2 - \frac{1}{12}(N^2 - 1) \\
 P_3(x) &= x^3 - \frac{1}{20}(3N^2 - 7)x \\
 P_4(x) &= x^4 - \frac{1}{14}(3N^2 - 13)x^2 + \frac{3}{560}(N^2 - 1)(N^2 - 9)
 \end{aligned}$$

```

c -----
c  subroutine gramjxi (N,X,M,GRAM)
c
c  LOS POLINOMIOS ORTOGONALES DE GRAM SUCESIVOS se obtienen por una
c  FORMULA DE RECURRENCIA
c  -----
c  dimension X(100),GRA(100,0:20),GRAM(100,0:20)
c  -----
c  asignar el numero de puntos a una variable real
c
c  AN=N
  
```

```
c -----
  if (M .eq. 1) then
    do I=1,N
      GRA(I,1)=X(I)
      GRAM(I,1)=X(I)
    enddo
  else
    do I=1,N
      do J=0,M-2
c
          VNJ=(J+1)**2*(AN**2-(J+1)**2)/(4*(4*(J+1)**2-1))
c
          GRA(I,0)=1.0
          GRAM(I,0)=1.0
c
          GRA(I,J+2)=X(I)*GRA(I,J+1)-VNJ*GRA(I,J)
          GRAM(I,J+2)=GRAM(I,J+2)
c
      enddo
    enddo
  endif
c -----
  return
c
  end
c -----
```

BIBLIOGRAFÍA

Ralston, A., Introducción al Análisis Numérico, Cap 2, págs. 47-74 y Cap. 6, Limusa-Wiley, primera edición, México, 1970.